

【補助事業概要の広報資料】

補助事業番号 23-113

補助事業名 平成23年度 カーボン材料の機械的物性計算・評価補助事業

補助事業者名 愛媛大学 大学院理工学研究科 生産環境工学専攻 教授 岡本伸吾

1 補助事業の概要

(1) 事業の目的

カーボン材料は優れた機械的特性・電気的特性を有し、航空機、自動車、自転車などの輸送機器の構造部材に適用が進んでいる。カーボン材料の基本構造であるダイヤモンドやグラファイトの理想強度は100GPaを超えることが第一原理計算や実験等により知られているが、現実のカーボン材料の強度はその数%しか発現できていない。種々の欠陥を含むカーボン材料のナノレベルの構造と強度の関係を分子動力学(MD)シミュレーションの手法を用いて研究し、高強度を発現するカーボン材料の構造を明らかにする。これにより、カーボン材料の強度が向上できれば、輸送機器へのさらなる適用拡大を図ることができる。

(2) 実施内容

カーボン材料の機械的物性計算・評価に関する研究

(<http://www.me.ehime-u.ac.jp/labo/kikaisys/robins/index.htm>)

A. シミュレーションプログラムの並列化

現実のカーボン材料は、原子空孔や異種原子などの原子レベルの格子欠陥の他に、結晶粒界や配向度などの大スケールの構造欠陥を含む。構造欠陥を扱うためには、少なくとも10nm、原子数10万程度の大きさの解析モデルを用いる必要がある。本事業では、原子数10万以上のモデルの引張り変形シミュレーションが実現できる計算速度を得るため、これまでに事業者らが開発したMDシミュレーションプログラムを基に、プログラムの並列化を検討した。並列計算のソフトウェアとしてMPI(メッセージ・パッシング・インターフェース)を用い、解析モデルを空間分割して領域毎にCPUを割り当てる領域分割法を採用した。並列計算は東京大学情報基盤センターのスーパーコンピュータHA8000システムを用いて行った。

検討の結果、従来は4千原子モデルで10日必要だったが、13万原子のモデルで512CPUを用いた場合、7日間でカーボン材料の引張破壊をシミュレートできる計算手法を確立した。これによりカーボン材料に含まれる粒界や配向度を扱うことが可能となった。

I. カーボン材料の構造モデル作成

カーボン材料の限界強度(マクロ欠陥の無い材料の強度)を推定するため、配向角の異なる複数のグラファイト単結晶を積み重ねたモデルを作成し、分子動力学の手法を用いて結晶間に粒界を生成させ、多結晶体を形成した。得られた多結晶体における

グラフェン網面間の間隔や、配向度を調べた結果、現実のカーボン材料に近い解析モデルが得られていることを確認した。

ウ. 限界強度の計算

イで作成した解析モデルの引張りシミュレーションを行い、限界強度を計算した結果、引張強度10~30GPaとなり、現実のカーボン材料の強度低下を説明できる程度の強度低下が得られた。

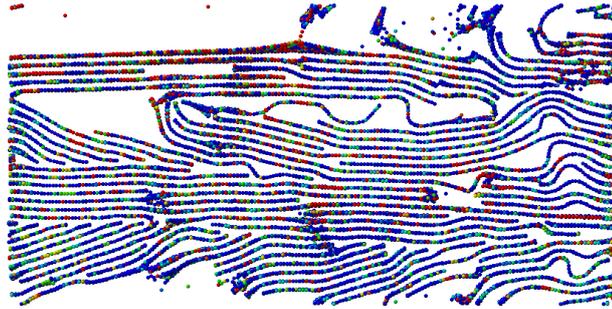


図1 解析モデルの引張り途中の構造

エ. 構造パラメータが強度に与える影響

ア~ウの検討とは別に、個々の構造パラメータすなわち欠陥と機械的特性との関係について基礎的な知見を蓄積することを目的として、原子空孔、窒素原子、 sp^3 結合、結晶子の配向角、結晶子間の粒界が強度に与える影響について調べた。

その結果、現実のカーボン材料に含まれる欠陥濃度の範囲であれば、原子空孔、窒素原子、 sp^3 結合に関しては大きな影響は見られなかった。一方、構造欠陥である結晶子の配向角は強度に大きく影響している結果を得た。

また、原子空孔に関しては、空孔のサイズや分布状態が強度に与える影響について、詳細に調べた結果、空孔のサイズに関しては、引張り方向に対して垂直方向のサイズが強度に影響し、欠陥を含む脆性材料の破壊において、欠陥サイズと強度の関係を示したGriffithの理論式と一致する結果が得られた。

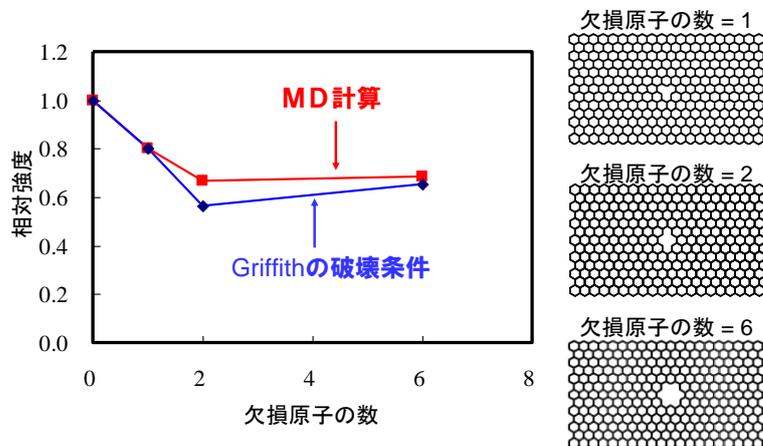


図2 原子空孔を含むグラフェンの強度

窒素原子に関しても、窒素原子の濃度や分布状態が強度に与える影響について調べた。その結果、グラフェンの平面内に2つの窒素原子が隣り合って存在する場合（図3内丸印）に、強度低下が大きいという結果を得た。

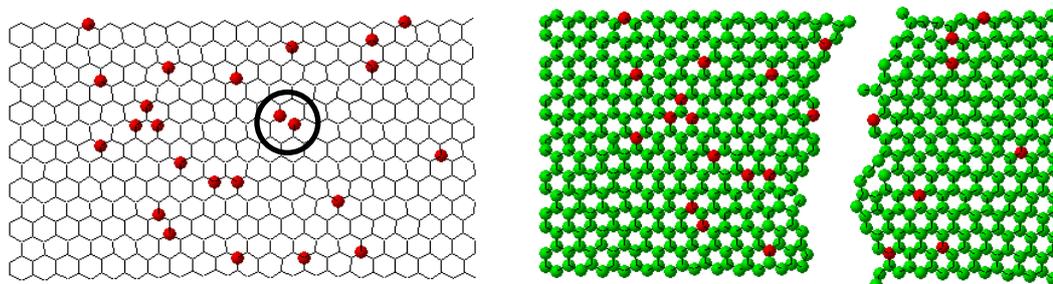


図3 窒素原子を含むグラフェンの構造



図4 国際会議(IMECS 2012)での発表風景

2 予想される事業実施効果

本事業の研究により得られた最も大きな成果は、カーボン材料の強度を支配する因子を絞り込めたことにある。さらに、並列計算の手法確立により、これまで扱えなかった大スケールの欠陥についても解析モデルに組み込み、現実的なタイムスケールでの検討が可能となった。ただ、カーボン材料の構造モデルと実際の材料との整合性に関して、ヤング率等の基礎的な物性の一致が不十分であることが判明した。この原因は現実の構造が未だ完全にとらえ切れていないためであると考えられる。対策として、X線解析や陽電子消滅法等により欠陥構造の実験的な知見を増やし、モデルの精密化を試みる事が重要である。

3 本事業により作成した成果物等

【学会発表・論文】

- (1) 原子空孔を含むグラフェンとグラファイトの引張りに関する分子動力学シミュレーション（日本機械学会論文集A編）
- (2) 原子空孔を含むグラファイトの機械的特性に関する分子動力学シミュレーション

(分子シミュレーション討論会予稿集)

- (3) Mechanical Properties of Vacancy-containing Graphene and Graphite using Molecular Dynamics Simulations (Proceedings of IMECS 2012)
- (4) Investigation of Mechanical Properties of Nitrogen-containing Graphene using Molecular Dynamics Simulations (Proceedings of IMECS 2012)
- (5) Molecular Dynamics Simulations on Multicrystalline Graphite Containing Grain Boundaries (Proceedings of SAMPE 2012)
- (6) Verification of a Bond-order Function that Applies to both sp² and sp³ Carbons (Proceedings of SAMPE 2012)

【導入した設備】

- (1) モバイルワークステーション
メーカー名 : Mouse computer
設置場所 : 愛媛大学大学院理工学研究科
岡本研究室



4 事業内容についての問い合わせ先

所属機関名 : 愛媛大学大学院理工学研究科 (エヒメダイガク ダイガクインリコウガクケンキュウカ)

住 所 : 〒790-8577

愛媛県松山市文京町3番

申 請 者 : 教授 岡本伸吾 (オカモトシンゴ)

担 当 部 署 : 生産環境工学専攻 機械工学講座 (セイサンカンキョウコウガクセンコウ キカイコウガクコウザ)

E-mail : okamoto.shingo.mh@ehime-u.ac.jp

U R L : <http://www.me.ehime-u.ac.jp/labo/kikaisys/robins/index.htm>